

电子多声子作用对散射时间的效应*

刘 福 绥 范希庆 刘视章 王淮生 阮 英 超
(北京大学物理系) (郑州大学物理系) (黑龙江大学物理系)

1988 年 2 月 11 日收到

本文给出电子多声子作用对电子寿命影响的一般讨论方法,同时给出温度 $T \gg$ 德拜温度 T_D 的表达式,指出 YBaCuO 体系中电子多声子作用对高温超导性可能是重要的。

Gurvitch 和 Fiory 实验中发现 90K 超导的 YBaCuO 体系和 40K 超导的 LaSrCuO 体系的正常态电阻分别在温度小于 600K 和 1100K 时,与温度成线性依赖关系,而在温度大于 600K 时 YBaCuO 体系电阻有陡升,在温度大于 1100K 时 LaSrCuO 体系电阻只有小的增加。G-F 认为 YBaCuO 的电阻高温陡升是由于高温失氧引起的。

考虑到高温时多声子作用变大,因此有必要研究多声子作用对电阻,电子散射时间等一些物理量的影响 Allen 等人曾研究晶格振动非简谐性对电阻的影响,解释了 V₃Si 高温电阻的饱和现象^[2,3]。雷啸霖导出了无序晶态合金电阻率的一般公式,并且在高温下考虑到 Debye-Waller 因子和多声子效应,得出电阻率饱和的结果^[4]。

本文目的在于研究电子多声子作用对散射时间的影响及对 G-F 观察到的高温电阻陡升现象提出其它可能的解释。G-F 观察到的低温电阻率对温度的线性依赖关系已由雷啸霖用二维 CuO 平面的缺陷态散射给以解释^[4]。

普遍的电子多声子相互作用哈密顿量为

$$H_{e-ph} = \sum_{i,l,\kappa} v(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_{l\kappa} - \mathbf{u}_{l\kappa}), \quad (1)$$

式中 $\mathbf{u}_{l\kappa}$ 为 l 元胞 κ 格点的原子对平衡位置 $\mathbf{R}_{l\kappa}$ 的偏离, $\mathbf{r}_i$ 为电子位置。上式的三声子展开为

$$\begin{aligned} H_{e-ph} = & \sum_{i,l,\kappa} v(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_{l\kappa}) + \sum_{i,l,\kappa} \mathbf{u}_{l\kappa} \cdot \nabla_i v(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_{l\kappa})(-1) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i,l,\kappa} \mathbf{u}_{l\kappa} \mathbf{u}_{l\kappa} : \nabla_i \nabla_i v(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_{l\kappa}) \\ & + \frac{1}{6} \sum_{i,l,\kappa} \mathbf{u}_{l\kappa} \mathbf{u}_{l\kappa} \mathbf{u}_{l\kappa} : \nabla_i \nabla_i \nabla_i v(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_{l\kappa})(-1), \end{aligned} \quad (2)$$

式中符号 $\cdot$ 代表一次矢量点乘。用声子算符有

$$\mathbf{u}_{l\kappa} = \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\sqrt{NM_{\kappa}}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_l} \left[\frac{\hbar}{2\omega_j(\mathbf{q})} \right]^{\frac{1}{2}} \mathbf{e}_{\kappa j \mathbf{q}} \phi_j(\mathbf{q}), \quad (3)$$

$$\phi_j(\mathbf{q}) = a_j(\mathbf{q}) + a_j^*(-\mathbf{q}), \quad (4)$$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (5)$$

* 国家自然科学基金资助的课题。

式中 $a_j(\mathbf{q})$ 为声子湮没算符, $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 为电子波函数. 将(3),(4),(5)三式代入(2)式, 完成矩阵元计算, 有

$$\begin{aligned} H_{e-ph} = & \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, j} g_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, j}^{(1)} c_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} c_{\mathbf{k}_2} c_j(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \\ & + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, j_1, j_2} g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, j_1, j_2}^{(2)} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}_1} c_{\mathbf{k}_2} c_j(\mathbf{k}) \phi_{j_1}(-\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \\ & + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, j_1, j_2, j_3} g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, j_1, j_2, j_3}^{(3)} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}_1} c_{\mathbf{k}_2} c_j(\mathbf{k}) \phi_{j_1}(\mathbf{k}_1) \phi_{j_2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}), \quad (6) \end{aligned}$$

式中

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_2, j}^{(1)} = & \sum_{\mathbf{r}} \left[\frac{\hbar N}{2M_e \omega_j(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)} \right]^{\frac{1}{2}} v(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{r}}} \\ & \cdot (-i)(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{r}, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2}, \quad (7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, j_1, j_2}^{(2)} = & \sum_{\mathbf{r}} -\frac{1}{2} (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{r}, \mathbf{k}_1} (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{r}, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}} \\ & \cdot \frac{1}{M_e} \left[\frac{\hbar^2}{2\omega_{j_1}(\mathbf{k}) 2\omega_{j_2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k})} \right]^{\frac{1}{2}} v(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{r}}}, \quad (8) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, j_1, j_2, j_3}^{(3)} = & \sum_{\mathbf{r}} \frac{i}{6} (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{r}, \mathbf{k}_1} (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{r}, \mathbf{k}_1} \\ & \cdot (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{r}, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}} v(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \\ & \cdot e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{r}}} \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{1}{M_e} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\hbar^3}{8\omega_{j_1}(\mathbf{k}) \omega_{j_2}(\mathbf{k}_3) \omega_{j_3}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k} - \mathbf{k}_3)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (9) \end{aligned}$$

温度格林函数方法中的二声子自能表达式为

$$\begin{aligned} \Sigma^{(2)}(k, i\omega_n) = & +T^2 \sum_{\substack{\mathbf{k}', \mathbf{k}'', \\ (1') m_p}} \left[\frac{\Lambda_g^{(2)}}{\varepsilon_{\text{RPA}}} \right]^2 G(\mathbf{k}' i\omega_m) D_1(\mathbf{k}'' i\omega_p) D_2(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{k}'' i\omega_n - i\omega_m - i\omega_p) \\ = & T^2 \sum_{m_p} \sum_{\substack{\mathbf{k}', \mathbf{k}'', \\ (1') \lambda'}} \left[\frac{\Lambda_g^{(2)}}{\varepsilon_{\text{RPA}}} \right]^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \left[\frac{-\text{Im } G(\mathbf{k}' \omega' + i0^+)}{i\omega_m - \omega'} \right] \\ & \cdot \int_0^{\omega} dQ B_{\lambda}(\mathbf{k}' Q) \frac{2Q}{(i\omega_p)^2 - Q^2} \int_0^{\omega} dQ' B_{\lambda'}(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{k}' Q') \\ & \cdot \frac{2Q'}{(i\omega_n - i\omega_m - i\omega_p)^2 - Q'^2}. \quad (10) \end{aligned}$$

完成上式中的频率求和, 定义

$$\begin{aligned} K^{(2)}(i\omega_n Q Q' \omega') = & [f(\omega') + n(-Q')] \left[\frac{n(Q) + f(-\omega' - Q')}{i\omega_n - \omega' - Q - Q'} \right. \\ & \left. - \frac{n(-Q) + f(-\omega' + Q')}{i\omega_n - \omega' + Q - Q'} \right] \\ & + [-f(\omega') - n(Q')] \left[\frac{n(Q) + f(-\omega' - Q')}{i\omega_n - \omega' - Q + Q'} \right. \\ & \left. - \frac{n(-Q) + f(-\omega' + Q')}{i\omega_n - \omega' + Q + Q'} \right], \quad (11) \end{aligned}$$

式中 $f(\omega)$ 及 $n(Q)$ 分别代表费密分布及玻色分布。把 $i\omega_n$ 延拓到 $\omega + i0^+$, 求 $\Sigma^{(2)}(k\omega + i0^+)$ 的负虚部, 得出和二声子过程有关的散射时间为

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\tau^{(2)}} &= -\text{Im } \Sigma^{(2)}(k\omega + i0^+) \\ &= \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{Q}} \left| \frac{\Lambda g^{(2)}}{\epsilon_{\text{RPA}}} \right|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \left[-\text{Im} \frac{1}{\omega' + i0^+ - \epsilon(\mathbf{k}')} \right] \int dQ B_{\lambda}(\mathbf{k}'Q) \\ &\quad \cdot \int dQ' B_{\lambda'}(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{k}''Q') [-\text{Im } K^{(2)}(\omega + i0^+ QQ'\omega')]. \end{aligned} \quad (12)$$

以 $\mathbf{k}$ 为极轴, 令 $|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = q$, 把对 $\mathbf{k}'$ 的积分化为对 ϵ, q, φ 的积分。为求和平衡状态相应的散射时间, 在(12)式中取 $\omega = 0$ 。任意温度下 $\tau^{(2)}$ 和温度的关系可由(12)式给出。以下在 $T \gg T_D$ 的条件下, 求 $\tau^{(2)}$ 与温度的关系。此时近似取 $f(\pm\omega') = 1/2, n(\pm Q) = T/\pm Q$, 得到

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\tau^{(2)}} &= \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{Q}} \int \frac{d\epsilon dq d\varphi}{(2\pi)^3 v_F} \left| \frac{\Lambda g^{(2)}}{\epsilon_{\text{RPA}}} \right|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \pi \delta(\omega' - \omega) \int dQ B_{\lambda}(\mathbf{k}'Q) \\ &\quad \cdot \int dQ' B_{\lambda'}(\mathbf{q} - \mathbf{k}''Q') [-\text{Im } K(i0^+ QQ'\omega')] \\ &\approx \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{Q}} \int \frac{d\epsilon dq d\varphi}{(2\pi)^3 v_F} \left| \frac{\Lambda g^{(2)}}{\epsilon_{\text{RPA}}} \right|^2 \int dQ B_{\lambda}(\mathbf{k}'Q) \int dQ' B_{\lambda'}(\mathbf{q} - \mathbf{k}''Q') \frac{4T^2}{QQ'}. \end{aligned} \quad (13)$$

从(13)式可见二声子过程对散射时间的贡献与温度平方成正比。

为了更便于进行物理分析, 设单原子晶体, Einstein 声子谱 $\omega = Q_0$, Λ 和 ϵ_{RPA} 与波矢及声子极化无关, 考虑到在 $g^{(2)}$ 的表达式中有两个点乘的因子, 设声子模式是纵波, 对 $\mathbf{k}''$ 的求和做立体角平均, 定义二声子有效声子谱为

$$[\alpha^{(2)}]^2 F(Q') = \sum_{\mathbf{Q}} 2 \int \frac{qdq d\varphi}{(2\pi)^3 v_F} \left| \frac{\Lambda g^{(2)}}{\epsilon_{\text{RPA}}} \right|^2 B_{\lambda'}(Q'), \quad (14)$$

则(13)式简化为

$$\frac{1}{2\tau^{(2)}} = 4\pi T^2 \int dQ [\alpha^{(2)}]^2 F(Q) \frac{1}{Q} \int dQ' F(Q') \frac{1}{4\pi Q}. \quad (15)$$

三声子自能表达式为

$$\begin{aligned} \Sigma^{(3)}(\mathbf{p}i\omega_n) &= -T \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \mathbf{Q}''} \left| \frac{\Lambda g^{(3)}}{\epsilon_{\text{RPA}}} \right|^2 G(\mathbf{p}'i\omega_m) D_{\lambda}(\mathbf{k}i\omega_{m'}) D_{\lambda'}(\mathbf{k}'i\omega_{m''}) \\ &\quad \cdot D_{\lambda''}(\mathbf{p} - \mathbf{p}' - \mathbf{k} - \mathbf{k}'i\omega_n - i\omega_m - i\omega_{m'} - i\omega_{m''}). \end{aligned} \quad (16)$$

完成上式对频率的三重求和, 定义

$$\begin{aligned} K^{(3)}(i\omega_n QQ'Q'') &= \frac{[f(\omega') + n(-Q'')][n(Q') + f(-\omega' - Q'')][n(Q) + f(-\omega' - Q' - Q'')]}{i\omega_n - \omega' - Q - Q' - Q''} \\ &\quad + \frac{[f(\omega') + n(Q'')][n(Q') + f(-\omega' + Q'')][n(Q) + f(-\omega' - Q' + Q'')]}{i\omega_n - \omega' - Q - Q' + Q''} \\ &\quad - \frac{[f(\omega') + n(-Q'')][n(Q') + f(-\omega' - Q'')][n(Q) + f(-\omega' - Q' - Q'')]}{i\omega_n - \omega' - Q + Q' - Q''} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{[f(\omega') + n(Q'')][n(-Q') + f(-\omega' + Q'')][n(Q) + f(-\omega' + Q' + Q'')]}{i\omega_n - \omega' - Q + Q' + Q''} \\
& - \frac{[f(\omega') + n(-Q'')][n(Q') + f(-\omega' - Q'')][n(-Q) + f(-\omega' - Q' - Q'')]}{i\omega_n - \omega' + Q - Q' - Q''} \\
& + \frac{[f(\omega') + n(Q'')][n(Q') + f(-\omega' + Q'')][n(-Q) + f(-\omega' - Q' + Q'')]}{i\omega_n - \omega' + Q - Q' + Q''} \\
& + \frac{[f(\omega') + n(-Q'')][n(-Q') + f(-\omega' - Q'')][n(-Q) + f(-\omega' + Q' - Q'')]}{i\omega_n - \omega' + Q + Q' - Q''} \\
& - \frac{[f(\omega') + n(Q'')][n(-Q') + f(-\omega') - Q'')][n(-Q) + f(-\omega' + Q' + Q'')]}{i\omega_n - \omega' + Q + Q' + Q''},
\end{aligned} \tag{17}$$

与三声子过程有关的散射时间为

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2\tau^{(3)}} &= -\text{Im } \Sigma^{(3)}(\mathbf{p}\omega + i0^+) \\
&= - \sum_{\substack{\mathbf{p}'\mathbf{k}\mathbf{k}', \\ \lambda\lambda'\lambda'', m m' m''}} \left| \frac{\Lambda g^{(3)}}{\epsilon_{\text{RPA}}} \right|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \left[-\text{Im} \frac{1}{\omega' + i0^+ - \epsilon(\mathbf{p}')} \right] \int dQ B_\lambda(\mathbf{k}Q) \\
&\quad \cdot \int dQ' B_{\lambda'}(\mathbf{k}'Q') \int dQ'' B_{\lambda''}(\mathbf{p} - \mathbf{p}' - \mathbf{k} - \mathbf{k}'Q'') \\
&\quad \cdot [-\text{Im } K^{(3)}(\omega + i0^+ Q Q' Q'')].
\end{aligned} \tag{18}$$

(18)式可一般地给出三声子过程散射时间温度的关系。对(18)式做和(13)式同样的近似,有

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2\tau^{(3)}} &= 2 \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{k}', \\ \lambda\lambda'\lambda''}} \int \frac{qdq d\varphi}{(2\pi)^3 v_F} \left| \frac{\Lambda g^{(3)}}{\epsilon_{\text{RPA}}} \right|^2 \int dQ B_\lambda(\mathbf{k}Q) \int dQ' B_{\lambda'}(\mathbf{k}'Q') \\
&\quad \cdot \int dQ'' B_{\lambda''}(q - k - k'Q'') \frac{8T^3}{QQ'Q''}.
\end{aligned} \tag{19}$$

从(19)式可见三声子过程散射时间贡献与温度的三次方成正比。

为了便于进行物理分析,做和导出(15)式相同的近似,定义三声子有效声子谱为

$$[\alpha^{(3)}]^2 F(Q'') = \sum_{\lambda''} 2 \int \frac{qdq d\varphi}{(2\pi)^3 v_F} \left| \frac{\Lambda g^{(3)}}{\epsilon_{\text{RPA}}} \right|^2 B_{\lambda''}(Q''), \tag{20}$$

则(19)式化为

$$\frac{1}{2\tau^{(3)}} = 8\pi T^3 \int dQ [\alpha^{(3)}]^2 F(Q) \frac{1}{Q} \left[\int dQ F(Q) \frac{1}{4\pi Q} \right]^2. \tag{21}$$

由上述推导得出在三级近似下,散射时间倒数为

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi\lambda^{(1)}T + 4\pi\lambda^{(2)} \int dQ F(Q) \frac{1}{4\pi Q} T^2 + 8\pi\lambda^{(3)} \left[\int dQ F(Q) \frac{1}{4\pi Q} \right]^2 T^3, \tag{22}$$

式中 $\lambda^{(n)}$ 为与 n 声子过程相联系的电声子耦合常数,定义为

$$\lambda^{(n)} = 2 \int dQ [\alpha^{(n)}]^2 F(Q). \tag{23}$$

一般来说, n 声子过程在 $T \gg T_D$ 时散射时间与温度的 n 次方成正比,系数可按

(22)和(23)式写出来.

在 $\lambda = \lambda^{(1)} = \lambda^{(2)} = \lambda^{(3)} = \dots$ 的条件下, $1/\tau$ 可以求和, 得出简单的表达式为

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi\lambda T}{1 - 2T \int dQ F(Q)/(4\pi Q)}. \quad (24)$$

我们的理论公式 (22) 和 (24) 还不能找到直接的实验验证. 以下我们试图用于解释 Gurvitch 和 Fiory 的高温电阻陡升实验^[1]. 用试探函数 $\rho = a + bT/(1 - cT)$ 拟合 G-F 实验, 在 600 K 到 900 K 范围内符合很好, 其中 $a = 0.765 \text{ m}\Omega$, $b = 4.05 \times 10^{-4} \text{ m}\Omega \cdot \text{cm} \cdot \text{K}^{-1}$, $c = 1.01 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$. 这个函数形式可以由电子多声子作用得出. 由输运弛豫时间 τ_{tr} 求电阻率的玻耳兹曼公式为 $\rho(T) = 4\pi/(\omega_p^2 \tau_{tr})$. G-F 曾用 $\tau_{tr} = \tau$ 分析实验. 孙吟龙等人的数值计算表明, YBCO 的 τ 和 τ_{tr} 最大可相差 $(\tau - \tau_{tr})/\tau_{tr} = 1.15$. 本文中设 $\rho(T) = 4\pi c/(\omega_p^2 \tau)$, $0.47 \leq c \leq 1$. 把(24)式的 $1/\tau$ 表达式代入前式, 即可得到试探函数的形式. 这个结果不能肯定电子多声子作用是造成 YBCO 体系电阻率高温陡升的原因, 但是可以说至少提供一个可能的解释. 如果注意到 40 K 超导的 LSCuO 体系的电阻直到 1100 K 才有小的偏离线性的增加, 我们也可以推测电子多声子作用对 90 K 超导性是重要的.

本文作者之一刘福绥感谢和雷啸霖研究员的有益讨论.

- [1] M. Gurvitch and A. T. Fiory, *Phys. Rev. Lett.*, **59**(1987), 1337.
- [2] P. B. Allen and R. Silbergliitt, *Phys. Rev.*, **B9**(1974), 4733.
- [3] P. B. Allen, J. C. K. Hui and W. E. Pickett, *Solid State Comm.*, **13**(1976), 1157.
- [4] X. L. Lei, *J. Phys. C*, **21**(1988), L83.
- [5] 孙吟龙、刘福绥, 低温物理学报, 待发表.

EFFECT OF ELECTRON-MANY PHONON INTERACTION ON SCATTERING TIME

LIU FU-SUI

(Department of Physics, Peking University)

FAN XI-QING LIU YAN-ZHANG WANG HUAI-SHENG

(Department of Physics Zhengzhou University)

RUAN YING-CHAO

(Department of Physics, Heilongjiang University Haerbin)

ABSTRACT

A general approach for analysing the effect of electron-many phonon interaction on electron life time and the corresponding expressions are present for the case of temperature $T \gg$ Debye Temperature T_D . It is pointed out that the electron-many phonon interaction may be important for 90 K superconductivity in $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$.